

大規模確率場における予測と推論

Probabilistic Inference and Estimation in Large-scale Random Fields

田中和之

Abstract

本稿では大規模確率場を用いた情報処理のキーアプリケーションとしてのベイジアンネットワークと確率伝搬法について画像処理を中心に分かりやすく概説する。ベイジアンネットワークは観測データの生成過程からそのデータを生成する情報源を系統的に推論するための枠組みであり、確率伝搬法はそのベイジアンネットワークをアルゴリズムとして具体化する方法論である。

キーワード：統計科学, 確率場, ベイジアンネットワーク, グラフィカルモデル, 確率伝搬法

1. はじめに

大規模確率場を用いた情報処理の研究は Geman and Geman⁽¹⁾によるマルコフ確率場を用いた画像処理の提案から 1980 年代に一つのブームがあった。また、最近ではベイジアンネット (BN: Bayesian Network) による確率推論の発展とともに再び注目を集めつつある^{(2),(3)}。

近年、不確実さを含む大規模データを扱う情報処理に対する社会的要請はますます高まりつつある^{(4)~(8)}。この大規模データは単に個々の基本構成要素が独立に生成されているのではなく、何らかの特徴的な空間において互いに関連し合うことで初めて意味のあるデータとなる場合が多い。このような基本構成要素が互いに関連し合う形で確率的に生成されるデータを取り扱う理論的枠組みが確率場である。確率場はそれだけでは空間的に配置された確率変数の集まりであるが、BN の概念が加わることで様々な応用の道が開かれる。画像などの空間的データから予測と推論を系統的に行う道筋が提供されるわけであり、その道筋をアルゴリズムとして具体化してくれるのが確率伝搬法 (BP: Belief Propagation) と呼ばれる人工知能の計算技法なのである。

BP は 1980 年代半ばに人工知能の分野で提案され、誤

り訂正符号における高性能の復号アルゴリズムとして知られる低密度パリティ検査 (LDPC: Low Density Parity Check) 符号などの構造的な等価性が指摘され、急速に注目を浴びることとなる^{(9),(10)}。これはやがて Yedidia, Weiss and Freeman による一般化された確率伝搬法 (GBP: Generalized Belief Propagation) の提案へと展開してゆくのである⁽¹¹⁾。

本稿では、BN という立場からの大規模確率場を用いた予測と推論とそれをアルゴリズムとして実現するための方法論である BP について、画像処理という土俵の上で分かりやすく解説する。2. では大規模確率場を用いた情報処理を具体化する計算技法としての BP について簡単に説明する。大規模確率場を用いた画像処理の例として、3. では画像修復、4. では領域分割についてそれぞれ概説する。5. はまとめである。

2. グラフィカルモデルと確率伝搬法

本章では、大規模確率場の統計量を計算する近似アルゴリズムとして注目されつつある BP について簡単に解説する。確率情報処理の多くの問題は、後で紹介する画像処理にもあるように、確率変数ごとの期待値や分散、共分散、モーメントなどの統計量を計算する問題に帰着する。複数の確率変数 a_1, a_2, \dots, a_L をベクトル $\vec{a} = (a_1, a_2, \dots, a_L)$ として見ると、確率場は $P(\vec{a})$ と書ける。例えば a_i の期待値の定義式は $\sum_{\vec{a}} a_i P(\vec{a})$ であるが、これを普通に計算しようとする、特殊な場合を除いて一

田中和之 正員 東北大学大学院情報科学研究科応用情報科学専攻
E-mail kazu@smapi.is.tohoku.ac.jp
Kazuyuki TANAKA, Member (Graduate School of Information Sciences, Tohoku University, Sendai-shi, 980-8579 Japan).
電子情報通信学会誌 Vol.88 No.9 pp.698-702 2005 年 9 月

般には $O(\exp(L))$ の計算量を必要としてしまう．そこでより効率の良い近似アルゴリズムが必要になる．

確率分布 $P(\vec{a})$ において $1, 2, \dots, L$ の各ラベルにノードを対応させ，この中の幾つかのノード対がリンクにより結ばれているグラフを考え，すべてのノード対 ij についての積を $\prod_{ij}[\dots]$ により表し，ノードとリンクにより与えられたグラフに対して

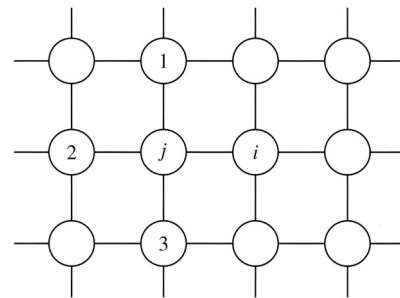
$$P(\vec{a}) = \frac{1}{D} \prod_{ij} W_{ij}(a_i, a_j) \quad (D \text{ は規格化定数}) \quad (1)$$

により与えられる確率分布を対応させる．このとき確率分布 $P(\vec{a})$ により与えられる確率モデルはグラフィカルモデルと呼ばれる．このグラフィカルモデルに対して近似を導入することにより期待値の計算をメッセージ $\mu_{j \rightarrow i}(a_i)$ と呼ばれる量に対する固定点方程式

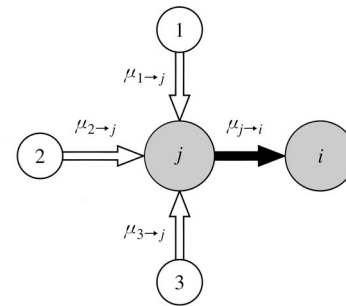
$$\mu_{j \rightarrow i}(a_i) = \frac{\sum_{a_j} W_{ij}(a_i, a_j) \prod_{j' \in C(j) \setminus i} \mu_{j' \rightarrow j}(a_j)}{\sum_{a_i, a_j} W_{ij}(a_i, a_j) \prod_{j' \in C(j) \setminus i} \mu_{j' \rightarrow j}(a_j)} \quad (2)$$

の求解に帰着させることができる⁽¹²⁾． $C(i)$ はノード i の隣接ノードの集合， $C(j) \setminus i$ はノード j の隣接ノードの集合からノード i を除いた集合を意味する．これにより，必要な計算量がうまくすれば $O(L)$ にまで減らすことができる．もちろん近似なので，得られる期待値は（数値計算の誤差を除いたとしても）厳密なものではないが，問題によっては厳密計算の値に近い値が得られるように近似を設計することが可能なのである．仮に各ノードの取り得る値が任意の実数値で与えられていれば，和は積分に置き換わり積分方程式となる．固定点方程式の分母と分子に現れる $\prod_{j' \in C(j) \setminus i} \mu_{j' \rightarrow j}(a_j)$ は高々，各ノードの隣接ノードの個数なので計算量は $O(1)$ となる．したがって，反復計算によるアルゴリズムの1回の更新ごとの計算量は $O(L)$ となるわけである．期待値，分散や共分散はメッセージを用いて表すことができるので，得られたメッセージを代入することで求められる．例えばノードとリンクにより形成されたグラフが図1(a)のような正方格子により与えられる場合，式(2)のメッセージ更新規則は図1(b)のように与えられる．

更にこのBPは式(1)の積 $\prod_{ij} W_{ij}(a_i, a_j)$ が3個あるいはそれ以上のノードから構成されるクリークに対する積 $\prod_{ijk} W_{ijk}(a_i, a_j, a_k)$ に置き換えられた場合にも拡張することができる．これが Yedidia, Weiss and Freeman⁽¹¹⁾ により提案されたGBPである．BPは反復計算アルゴリズムの更新規則がそれほど簡単ではないため収束性に関して幾つかの問題が指摘されている．最近，このGBPのアルゴリズムとしての挙動を情報幾何の立場か



(a) 正方格子



(b) メッセージ更新規則

図1 正方格子に対する確率伝搬法のメッセージ更新規則

ら解析しようという試みも報告されている⁽¹³⁾．

3. 大規模確率場を用いた画像修復

二次元的配列として定義された確率変数 $a_{x,y}$ ($x = 1, 2, \dots, M$, $y = 1, 2, \dots, N$) を想定した場合，この確率変数の集合が確率場である．本章ではこの確率場を用いた情報処理の一つとして確率的画像修復について文献(12)，(14)に沿って解説する．

画像は画素と呼ばれる基本単位が規則的に並べられ，その各画素が光を出すことでディスプレイ上に表示される．この画素が正方格子上に並べられているとして，一つ一つの画素の場所に (x, y) という二次元的なラベルを割り当て，すべての画素からなる集合を $\Omega = \{(x, y) | x = 1, 2, \dots, M, y = 1, 2, \dots, N\}$ という記号を用いて表すこととする．画素 (x, y) の光の強度，すなわち階調値についての確率変数を $a_{x,y}$ とすると，画像に対する確率場はベクトル

$$\vec{a} = (a_{1,1}, a_{1,2}, \dots, a_{1,N}, a_{2,1}, a_{2,2}, \dots, a_{2,N}, \dots, a_{M,1}, a_{M,2}, \dots, a_{M,N}) \quad (3)$$

により表現される．階調値はここでは任意の実数をとるものとする．我々が日常取り扱う画像は「ある着目した画素の階調値はその隣接画素の階調値に依存している」ことが多い．この考え方を實現する確率密度関数の一例を与えると次のようになる．

$$P(\vec{a}|\alpha) \equiv \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha \sum_{x=1}^M \sum_{y=1}^N ((a_{x,y} - a_{x+1,y})^2 + (a_{x,y} - a_{x,y+1})^2)\right) \quad (4)$$

ここで α は正の値をとり、 Z は規格化定数である。確率分布 $P(\vec{a}|\alpha)$ は平滑化された画像ほど高い確率を与える。この性質を画像処理に応用しようというものである。

画像修復はデータである劣化画像から原画像を推定する問題である。原画像の確率場を \vec{a} 、劣化画像の確率場を \vec{b} とする。確率場 \vec{a} は確率密度関数(4)に従い、確率場 \vec{b} は平均 0、分散 σ^2 のガウス分布に従う確率変数 $v_{x,y}$ から $b_{x,y} = a_{x,y} + v_{x,y}$ により原画像と関係するものとする。

$$P(\vec{b}|\vec{a}, \sigma) \equiv \prod_{x=1}^M \prod_{y=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (a_{x,y} - b_{x,y})^2\right) \quad (5)$$

劣化画像 \vec{b} が与えられたという条件のもとでの原画像に対する事後確率分布 $P(\vec{a}|\vec{b}, \alpha, \sigma)$ は式(4)と式(5)をベイズの公式

$$P(\vec{a}|\vec{b}, \alpha, \sigma) = \frac{P(\vec{b}|\vec{a}, \sigma) P(\vec{a}|\alpha)}{P(\vec{b}|\alpha, \sigma)} \quad (6)$$

$$P(\vec{b}|\alpha, \sigma) = \int P(\vec{b}|\vec{a}, \sigma) P(\vec{a}|\alpha) d\vec{a} \quad (7)$$

に代入することで得られ、原画像の推定値 \vec{a} とモデルパラメータの推定値 $(\hat{\alpha}, \hat{\sigma})$ は

$$\hat{a}_{x,y} = \int a_{x,y} P(\vec{a}|\vec{b}, \hat{\alpha}, \hat{\sigma}) d\vec{a} \quad ((x,y) \in \Omega) \quad (8)$$

$$(\hat{\alpha}, \hat{\sigma}) = \arg \max_{(\alpha, \sigma)} P(\vec{b}|\alpha, \sigma) \quad (9)$$

により決定される。式(7)の $P(\vec{b}|\alpha, \sigma)$ は (α, σ) の値が設定されたときに劣化画像 \vec{b} の生成される確率であるがこれを「劣化画像 \vec{b} が与えられたときの (α, σ) に対するもともらしさを表す関数」、すなわちちゆう度とみなしている。図2(a)に与えられた原画像と図2(b)の加法的白色ガウス雑音により劣化された劣化画像に対して2.で与えられたBPを用いて式(8)~(9)を近似的に計算することにより得られる修復画像 \vec{a} が図2(c)である。

本章で紹介した確率場 \vec{a} は多次元ガウス分布により表されるため厳密な取り扱いが可能である。図2(b)の加法的白色ガウス雑音により劣化された劣化画像に対して厳密解により構成されたアルゴリズムを適用した結果

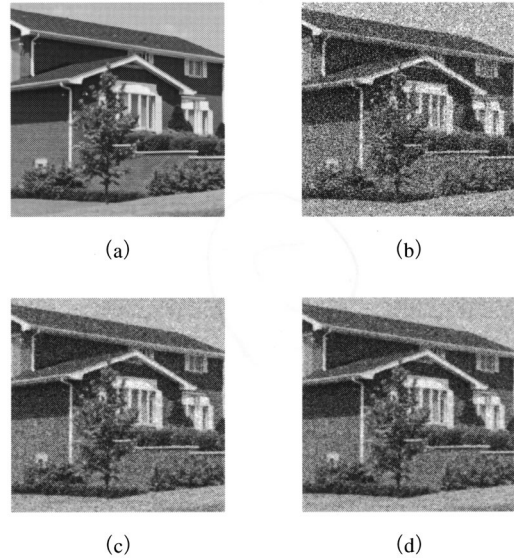


図2 大規模確率場を用いた画像修復の一例 (a)原画像. (b)劣化画像($\sigma=30$). (c)確率伝搬法による修復画像 ($\hat{\alpha}=0.000504$, $\hat{\sigma}=21.752$). (d)厳密解による修復画像 ($\hat{\alpha}=0.000514$, $\hat{\sigma}=22.002$).

を図2(d)に示す。上記の多次元ガウス分布に基づく確率的画像処理においては確率伝搬法が厳密解に非常に近い推定を与えていることが分かる。しかし、実際の画像処理の応用においては多次元ガウス分布だけでは不十分であり、エッジ状態に対する確率場など、複数の異なる種類の画像の特徴を結合した確率モデルの導入が必要となる。このような更に高度に改良された大規模確率場においては厳密な取扱いは困難であり、BPが重要な役割を果たすことが期待される。

4. 大規模確率場を用いた領域分割

本章ではもう一つの確率的画像処理の例として領域分割を取り上げる。領域分割は画像からの対象物の抽出を目的とするなどの基礎となる重要な技術であり、パターン認識などとも密接な関係がある。その言葉の示すとおり、画像を幾つかの領域に分割する処理であるが、分割された情報をその後、どのような目的に用いるかによって画像のどのような特徴を通して分類するかが決まってくるが、最も基本的な特徴はやはり階調値である。BPを用いた領域分割についてはChen, Tanaka and Horiguchi⁽¹⁵⁾が詳細な研究を行っている。本章では画像の階調値という最も基本的な特徴をもとに確率場を用いた領域分割についてBPを用いたアルゴリズムの初歩的な部分を紹介する。

階調値を用いて領域の分割を行う際、重要なのがその階調値についてのヒストグラムである。図3(a)の標準画像に対する階調値のヒストグラムを図3(b)に与える。このヒストグラムを見ると幾つかの山が存在するこ

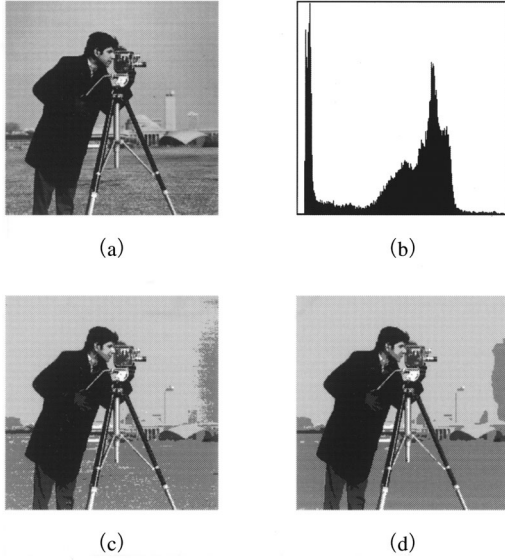


図3 混合ガウス分布と大規模確率場を用いた領域分割 (a) 観測画像, (b) (a)の観測画像のヒストグラム, (c)混合ガウス分布を用いた領域分割, (d)混合ガウス分布と大規模確率場を用いた領域分割.

とが見てとれる. 山と山の間谷の部分にしきい値を設定し, しきい値処理を行うことで領域分割ができそうである. しかしながら, 見てのとおり山と山の間谷をどこに設定したらよいかの基準を明確に設定することは難しい. そこで, このヒストグラムが複数のガウス分布の重ね合わせであると仮定してその平均と分散を推定することがまず考えられるわけである. これが領域分割における統計的手法の基本であり, 同様の接近法は膨大なデータの中から統計量として特徴を抽出し, 分類する際に一般的に用いられる^{(4)~(7)}.

各画素を K 個のクラスの $\{1, 2, \dots, K\}$ のいずれかに属するものとし, 画素 (x, y) がクラス k に属するとき, これを確率変数 $a_{x,y}$ を用いて $a_{x,y} = k$ と表すこととする. 確率変数 $a_{x,y}$ から構成される確率場 \vec{a} は領域場と呼ばれる. 領域場は領域分割の際の各画素がどの領域に割り当てられるかを表現するものであり, 各画素がどの領域に属するかをラベルにより分類し, それを画像という形で表現した領域分割画像を表しているとみなすことができる. この領域分割画像 \vec{a} を一つ固定したときに各画素 (x, y) ごとに生成される階調値についての確率場を \vec{b} により表すこととする. すなわち \vec{b} はある一つの濃淡画像を表している. 領域分割画像 \vec{a} についての確率分布 $P(\vec{a}|\vec{\gamma})$ は次のように与えられるものと仮定する.

$$P(\vec{a}|\vec{\gamma}) = \prod_{x=1}^M \prod_{y=1}^N \gamma(a_{x,y}) \quad (\gamma(k) \geq 0, \sum_{k=1}^K \gamma(k) = 1) \quad (10)$$

領域分割画像 \vec{a} が与えられたときの濃淡画像 \vec{b} につい

ての確率分布 $P(\vec{b}|\vec{a}, \vec{\mu}, \vec{\sigma})$ は次のように与えられるものと仮定する.

$$P(\vec{b}|\vec{a}, \vec{\sigma}, \vec{\mu}) = \prod_{x=1}^M \prod_{y=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma(a_{x,y})} \times \exp\left(-\frac{1}{2\sigma(a_{x,y})^2} (b_{x,y} - \mu(a_{x,y}))^2\right) \quad (\sigma(k) \geq 0) \quad (11)$$

ここで, $(\vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma})$ は便宜上導入したモデルパラメータであるが, 実際にはこれも計算により推定する. ベイズの公式から得られる事後確率分布 $P(\vec{a}|\vec{b}, \vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma})$ 及び周辺ゆう度 $P(\vec{b}|\vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma})$ を用いて, 領域分割画像 \vec{a} の推定値は

$$\vec{a}_{x,y} = \sum_{\vec{a}} a_{x,y} P(\vec{a}|\vec{b}, \vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma}) \quad ((x, y) \in \Omega) \quad (12)$$

により, モデルパラメータ $(\vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma})$ の推定値は

$$(\vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma}) = \arg \max_{(\vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma})} P(\vec{b}|\vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma}) \quad (13)$$

により, それぞれ決定できる. この事後確率分布 $P(\vec{a}|\vec{b}, \vec{\gamma}, \vec{\mu}, \vec{\sigma})$ は複数の平均と分散の値を持つガウス分布を用いて表されることから混合ガウス分布と呼ばれている. 式(12)~(13)に基づくアルゴリズムはやはり反復計算アルゴリズムの形に与えられるが, その更新式はガウス積分の公式を用いて解析的な形で書き下される. 混合ガウス分布を用いて図3(a)の濃淡画像から得られた領域分割画像 ($K=5$) を図3(c)に与える. 更に確率分布 $P(\vec{a}|\vec{\gamma})$ を

$$P(\vec{a}|\vec{\gamma}) = \frac{1}{Z} \prod_{x=1}^M \prod_{y=1}^N \gamma(a_{x,y}) \times \exp(\alpha \delta_{a_{x,y}, a_{x+1,y}} + \alpha \delta_{a_{x,y}, a_{x,y+1}}) \quad (Z \text{ は規格化定数}) \quad (14)$$

で置き換えると, 図3(d)のようなより良好な領域分割結果が得られる.

本章では確率的領域分割の最も基本的な場合に言及して説明した. 領域分割は, 動画像における移動体の検出, 航空写真などからの対象物の抽出, 医用画像からの特定の対象の抽出などを目的とする要素技術の一つである. どのような応用を目的として領域分割を考えるかによって式(11)をどのように仮定するかが変わってくる.

5. む す び

本稿は確率場を用いた予測と推論について画像処理を

例にとって解説した。ここでは画像修復と領域分割という二つの例で説明したが、このほか、例えば低解像度画像から高解像度画像の生成などにも応用されている⁽²⁾。全体を通して、不確実さを含むデータから知りたいことを取り出すための計算技法が統計科学と統計力学という伝統的数理科学の手法に基づいて系統的に組み立てられようだという感じとて頂ければ幸いと考えている。ここで紹介した大規模確率場に対するBNの計算技法はMATLABのソフトウェアなどの形でのパッケージ化とWeb上での公開が研究者レベル、企業レベルのそれぞれで急速に進められている。パーソナルコンピュータはもとよりデジタル機器から自動車に至る日常の家電製品へと実装される日もそう遠くないものと期待される。

確率場を用いた情報処理の基盤となる計算技術がBNとBPということになるが、Yedidia, Weiss and Freeman⁽¹¹⁾によるBPの一般化はクラスタ変分法と呼ばれる統計力学の近似解析手法を基に達成されている。このクラスタ変分法は1950年代に菊池良一氏という日本人によって、合金の相図の作成を目的に考案され、主として統計力学における日本人研究者により受け継がれ、改良されてきた近似解析技術である⁽¹⁶⁾。その伝統は確率的情報処理における世界に先駆けた日本人の若手研究者の最近の研究成果へと結びついているのである⁽¹⁷⁾。

文 献

- (1) S. Geman and D. Geman, "Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images," *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, vol.6, no.6, pp.721-741, Nov. 1984.
- (2) W.T. Freeman, T.R. Jones, and E.C. Pasztor, "Example-based super-resolution," *IEEE Comput. Graph. Appl.*, vol.22, no.2, pp.56-65, March/April 2002.
- (3) K. Tanaka, "Statistical-mechanical approach to image processing," *J. Phys. A Math. Gen.*, vol.35, no.20, pp.R81-R150, Sept. 2002.

- (4) 上田修功, "ベイズ学習 [I]——統計的学習の基礎——," *信学誌*, vol.85, no.4, pp.265-271, April 2002.
- (5) 上田修功, "ベイズ学習 [II]——ベイズ学習の基礎——," *信学誌*, vol.85, no.6, pp.421-426, June 2002.
- (6) 上田修功, "ベイズ学習 [III]——変分ベイズ学習の基礎——," *信学誌*, vol.85, no.7, pp.504-509, July 2002.
- (7) 上田修功, "ベイズ学習 [IV・完]——変分ベイズ学習の応用例——," *信学誌*, vol.85, no.8, pp.633-638, Aug. 2002.
- (8) 特集 "統計モデルと学習の数理," *人工知能誌*, vol.19, no.6, pp.635-669, Nov. 2004.
- (9) 和田山 正, "LDPC符号とsum-product復号法," *数理科学*, vol.42, no.11, pp.36-41, Nov. 2004.
- (10) 特集 "ベイジアンネットワーク," *人工知能誌*, vol.17, no.5, pp.539-565, Sept. 2002.
- (11) J.S. Yedidia, W.T. Freeman, and Y. Weiss, "Generalized belief propagation," *Advances in Neural Information Processing Systems*, Cambridge, MA, MIT Press, vol.13, pp.689-695, 2001.
- (12) 田中和之, "確率モデルと画像分析——ゆらぎの生み出す新しい情報処理の世界——," *数理科学*, vol.42, no.3, pp.15-21, March 2004.
- (13) S. Ikeda, T. Tanaka, and S. Amari, "Stochastic reasoning, free energy, and information geometry," *Neural Comput.*, vol.16, no.9, pp.1779-1810, Sept. 2004.
- (14) K. Tanaka, H. Shouno, M. Okada, and D.M. Titterton, "Accuracy of the Bethe approximation for hyperparameter estimation in probabilistic image processing," *J. Phys. A Math. Gen.*, vol.37, no.36, pp.8675-8696, Sept. 2004.
- (15) F. Chen, K. Tanaka, and T. Horiguchi, "Image segmentation based on Bethe approximation for Gaussian mixture model," *Interdisciplinary Information Sciences*, vol.11, no.1, pp.17-29, March 2005.
- (16) R. Kikuchi, "A theory of cooperative phenomena," *Phys. Rev.*, vol.81, no.6, pp.988-1003, March 1951.
- (17) ミニ特集 "ベイズ統計・統計力学と情報処理," *計測と制御*, vol.42, no.8, pp.622-660, Aug. 2003.



田中 和之 (正員)

昭59 東北大・工・電子卒。平元同大学院博士課程了。工博。同年東北大助手。平6 室蘭工大助教授。平11 東北大助教授。現在、同大学院情報科学研究科助教授。文科省科研費特定領域「確率的情報処理への統計力学的アプローチ」領域代表。